

На правах рукописи

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'A.S. Ermilov', written in a cursive style.

Ермилов Андрей Сергеевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА
НА КВАДРУПОЛЬНЫХ ЯДРАХ**

Специальность 01.04.03 — радиофизика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН)

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Зобов Владимир Евгеньевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, доцент
Булгаков Евгений Николаевич
ведущий научный сотрудник ИФ СО РАН

кандидат физико-математических наук, доцент
Кучеров Михаил Михайлович
доцент кафедры Прикладной математики и компьютерной безопасности
Федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего профессионального образования
Сибирского федерального университета

Ведущая организация:
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем химической физики Российской академии наук
г. Черноголовка

Защита состоится
" ____ " декабря 2013 г. в 14:30 на заседании диссертационного совета Д 003.055.01
в ИФ СО РАН по адресу: 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50, строение 38

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН

Автореферат разослан " ____ " ноября 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 003.055.01
доктор физико-математических наук



Втюрин Александр Николаевич

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Квантовые методы обработки информации привлекают большое количество специалистов из различных научных и технических областей. В настоящее время уже достигнуты значительные успехи в теоретическом изучении квантовых вычислений [1], и дальнейшее развитие исследований в основном ограничено техническими возможностями в управлении квантовыми системами [2].

В силу некоторой преемственности, в качестве элементарных носителей квантовой информации – кубитов – рассматриваются квантовые объекты всего с двумя дискретными состояниями, и основная часть работ, посвященных квантовому вычислению, выполнена с точки зрения оперирования такими двухуровневыми (т.е. всего с двумя доступными уровнями энергии) кубитами.

Однако значительно чаще в природе встречаются квантовые объекты с большим числом уровней, поэтому активно обсуждаются вопросы практического применения таких объектов, называемых в общем случае кудитами, для выполнения квантовых вычислений.

Уже доказано [3-5], что с помощью универсального набора одно- и двухкудитовых элементарных логических операторов (квантовых вентилях) можно выполнить любой квантовый алгоритм. Тем не менее, получено очень мало конкретных квантовых схем, допускающих экспериментальную реализацию квантовых вычислений на кудитах.

С другой стороны, современные импульсные методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР) оказались весьма эффективными для выполнения простых квантовых алгоритмов, благодаря хорошо развитым методам управления с помощью резонансных импульсов радиочастотного (РЧ) магнитного поля [6]. В том числе, существует ряд работ по управлению состояниями отдельных кудитов, представленных квадрупольными ядрами со спином $I > 1/2$ [6-10].

Таким образом, разработка способов выполнения квантовых вычислений на кудитах является актуальной и практически значимой задачей. Поскольку экспериментальная реализация простейших квантовых компьютеров сдерживается современным уровнем технологий, численное моделирование является эффективным методом исследования возможной реализации квантовых вычислений.

Целью диссертационной работы является разработка схем для реализации простых квантовых алгоритмов для системы кудитов, представленных связанными квадрупольными ядрами со спинами $I > 1/2$, управляемыми методами ЯМР, а также численное моделирование работы полученных алгоритмов.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Получение схемы реализации простых квантовых алгоритмов на кудитах.
2. Нахождение последовательности РЧ импульсов для выполнения алгоритмов на квадрупольных ядрах со спином $I > 1/2$.

3. Численное моделирование эволюции квантовой системы под действием полученной последовательности РЧ импульсов.
4. Исследование зависимости результатов квантового вычисления от различных физических параметров системы и анализ полученных результатов.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Разработаны схемы для практического осуществления квантового преобразования Фурье (КПФ) на кудитах. Рассчитаны последовательности РЧ импульсов для реализации вентиля КПФ на отдельных кудитах, представленных квадрупольными ядрами со спином $1 \leq I \leq 9/2$. Последовательности для случаев ядер со спинами $3/2 \leq I \leq 9/2$ найдены впервые.
2. Впервые получена схема для выполнения квантового алгоритма поиска порядка подстановки на двух кудитах, а также рассчитана последовательность РЧ импульсов для реализации алгоритма на системе связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 7/2$ и $I_2 = 3/2$, выполнено численное моделирование работы алгоритма.
3. На основании существующего метода организации адиабатического квантового вычисления предложен оригинальный способ реализации адиабатических квантовых алгоритмов. Выполнено численное моделирование адиабатической реализации квантового алгоритма поиска порядка подстановки на двух квадрупольных ядрах со спинами $I_1 = 7/2$ и $I_2 = 3/2$.
4. Впервые получена схема для выполнения адиабатического квантового алгоритма факторизации на двух кудитах и рассчитана последовательность РЧ импульсов для факторизации чисел 35, 21 и 15 на системе связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 3/2$ и $I_2 = 1$, выполнено численное моделирование работы алгоритма.

Теоретическая и практическая значимость результатов работы заключается в демонстрации возможности выполнения простых квантовых алгоритмов на кудитах, представленных квадрупольными ядрами. Для реализации алгоритмов на двух ядрах с сильным квадрупольным взаимодействием, типичным для твердых тел, получены последовательности РЧ импульсов, селективных по переходам между уровнями. Исследована зависимость ошибки реализации от физических параметров и даны рекомендации для планирования эксперимента. Результаты работы также могут оказаться полезными при управлении другими многоуровневыми квантовыми системами.

Достоверность полученных результатов подтверждается согласованностью результатов численного моделирования с аналитическими оценками. Применяемые для численного моделирования модели соответствуют природе исследуемых объектов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Результаты исследования различных способов получения одночастичного вентиля КПФ для многоуровневых квантовых элементов. Последовательности операторов для получения вентиля КПФ на кудитах с числом энергетических уровней от 3 до 10.
2. Последовательности операторов для реализации квантового алгоритма поиска порядка подстановки на системе двух квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 7/2$ и $I_2 = 3/2$, управляемых селективными РЧ импульсами. Результаты численного моделирования работы алгоритма.
3. Результаты исследования различных вариантов адиабатической реализации квантового вычисления для алгоритмов, представленных в виде последовательностей квантовых вентилях. Оригинальный способ выполнения адиабатических алгоритмов, допускающий сравнительно простую практическую реализацию методами ЯМР. Результаты численного моделирования работы адиабатических квантовых алгоритмов, выполненных с использованием предложенного способа:
 - а) алгоритма вычисления КПФ на системе трех кубитов;
 - б) алгоритма поиска порядка подстановки на системе пяти кубитов;
 - в) алгоритма поиска порядка подстановки на системе двух квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 7/2$ и $I_2 = 3/2$.
4. Способ получения эффективного гамильтониана для выполнения адиабатического алгоритма факторизации на системе двух квадрупольных ядер, управляемых селективными РЧ импульсами. Последовательности РЧ импульсов для реализации алгоритма в случае ядер со спинами $I_1 = 3/2$ и $I_2 = 1$, а также результаты численного моделирования работы алгоритма.

Апробация работы. Основные результаты, представленные в диссертации, были доложены на Международной конференции «Micro- and nanoelectronics» (Звенигород, 2007 и 2009 гг.), Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых «ВНКСФ 12» (Новосибирск, 2006 г.), VIII Всероссийском семинаре «Моделирование неравновесных систем» (Красноярск, 2005 г.), научных конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков «НКСФ-2004» и «НКСФ-2005» (Красноярск, 2004 и 2005 гг.)

По теме диссертации опубликовано 12 научных работ: 5 статей в периодических изданиях из списка ВАК, 1 статья в российском рецензируемом журнале, 6 работ в сборниках материалов и тезисов международных и всероссийских научных конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложенных на 96 страницах, содержит 25 рисунков, 15 таблиц и 93 библиографических ссылки.

Основное содержание работы

Во введении дана общая характеристика диссертационной работы, обоснована актуальность темы, сформулированы основные цели исследования. Обозначена научная новизна и практическая ценность работы, приводятся положения и результаты, выносимые автором на защиту.

Первая глава работы носит обзорный характер. В этой главе определяются базовые понятия квантового бита (кубита) и элементарного квантового логического оператора (квантового вентиля), приводятся примеры основных квантовых вентилях. Описываются рассматриваемые в работе квантовые алгоритмы: квантовое преобразование Фурье и квантовый алгоритм поиска порядка подстановки, приводятся схемы работы алгоритмов и способы их реализации на кубитах. Также в этой главе вводится понятие адиабатического квантового вычисления и приводится краткий обзор задач, для решения которых различные группы авторов предлагают использовать данный способ выполнения квантовых вычислений.

В последней части главы рассмотрены различные варианты использования многоуровневых квантовых объектов для практической реализации квантовых вычислений. Один из вариантов – использование только двух уровней в качестве кубита. С одной стороны, такой вариант требует устранения помех от незадействованных уровней [11], с другой – допускает использование оставшихся уровней в качестве вспомогательных [12]. Еще один вариант – рассмотрение состояний квантового объекта как совместных состояний виртуальных кубитов [13]. Наконец, можно использовать сразу все состояния многоуровневого квантового объекта в качестве кубита – единицы квантовой информации с числом собственных состояний $d > 2$ [3–5]. В последнем случае необходимо реализовать квантовые вентили, оперирующие кубитами вместо кубитов.

Здесь же приводится физическая модель двух связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = (d_1 - 1)/2$ и $I_2 = (d_2 - 1)/2$, помещенных в аксиально-симметричное кристаллическое и сильное постоянное магнитное поля и управляемых с помощью РЧ импульсов. Данная модель используется в последующих главах для численного моделирования работы квантовых алгоритмов.

Зеэмановское взаимодействие отдельного ядра с постоянным магнитным полем и квадрупольное взаимодействие с аксиально-симметричным кристаллическим полем приводит к образованию $d_j = 2I_j + 1$ неэквидистантных уровней энергии [14]. Состояния с различными проекциями спина на ось квантования (ось Z), соответствующие этим уровням, могут быть использованы в качестве вычислительного базиса кубита.

При рассмотрении системы двух связанных ядер, к уже упомянутым взаимодействиям каждого ядра с внешними полями, добавляется еще спин-спиновое взаимодействие между ядрами. В результате, гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид [14]:

$$H_0 = -\omega_1 I_1^z - \omega_2 I_2^z + q_1 [(I_1^z)^2 - \frac{1}{3} I_1(I_1 + 1)] + q_2 [(I_2^z)^2 - \frac{1}{3} I_2(I_2 + 1)] - J I_1^z I_2^z, \quad (1)$$

где $\hbar = 1$ (энергия измеряется в единицах частоты), $\omega_j = \gamma_j B_0$ – ларморова частота прецессии спина под действием постоянного магнитного поля, q_j – константа квадрупольного взаимодействия ядра с градиентом кристаллического поля, J – константа спин-спинового взаимодействия между ядрами, I_j^z – оператор проекции спина.

Управление отдельным ядром осуществляется с помощью РЧ импульсов, селективных по переходам между уровнями энергии. Действие отдельного импульса РЧ поля с амплитудой B_{rf} и частотой ω_{rf} в течение времени $t_{rf} \gg 1/\omega_{rf}$ на состояние квантовой системы задается оператором эволюции, который при переходе во вращающуюся с частотой ω_{rf} систему координат (ВСК) может быть записан как [14]:

$$U_{rf}(t_{rf}) = \exp(-iH_{rf}t_{rf}), \quad (2)$$

где H_{rf} – независящий от времени эффективный гамильтониан:

$$H_{rf} = H_0 + \omega_{rf}(I_{1z} + I_{2z}) - \Omega_1(I_{1x} \cos \varphi_{rf} + I_{1y} \sin \varphi_{rf}) - \Omega_2(I_{2x} \cos \varphi_{rf} + I_{2y} \sin \varphi_{rf}). \quad (3)$$

Если частоту поля выбрать равной частоте перехода между уровнями энергии отдельного ядра: $\omega_{rf} = \varepsilon_s - \varepsilon_r$, то в первую очередь будут изменяться состояния, соответствующие выбранному резонансному переходу. Если при этом амплитуда поля удовлетворяет условию селективности:

$$J \ll \Omega_j \ll q_j, \quad \Omega_j = \gamma_j B_{rf}, \quad (4)$$

то действие РЧ импульса может быть рассмотрено как элементарная операция над кудитом, описываемая оператором поворота [13], преобразованным к виду:

$$R_{\eta}^{r-s}(\theta) = \left\{ \theta \right\}_{\eta}^{r-s} = \begin{pmatrix} E_{r-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\theta}{2} & 0 & -ie^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & E_{s-r-1} & 0 & 0 \\ 0 & -ie^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} & 0 & \cos \frac{\theta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{d-s} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где E_n – единичная матрица размера $(n \times n)$, угол поворота $\theta = t_{rf} \Omega_j \langle rs | I_j^x | rs \rangle$, направление вращения η задается фазой РЧ поля φ_{rf} . Поскольку РЧ поле, используемое для управления кудитами, обычно направленно поперечно оси Z, то операторы поворота вокруг этой оси можно осуществлять либо с помощью составного импульса [7], либо с помощью сдвига фазы φ_{rf} соседних импульсов [15].

Вторая глава посвящена проблеме реализации квантовых вентилях на кудитах, а также их применения для выполнения простых квантовых алгоритмов. В первом разделе рассмотрено получение двухкудитового вентиля контролируемого сдвига фазы $P_{d_1 d_2}(\theta)$. Данный вентиль описывается матричным оператором в пространстве состояний двух кудитов, чьи элементы определяются следующим образом:

$$\langle km | P_{d_1 d_2}(\theta) | km \rangle = \exp(ikm\theta), \quad k = 0 \dots (d_1 - 1), \quad m = 0 \dots (d_2 - 1), \quad \theta = \frac{2\pi}{d_1 d_2}. \quad (6)$$

На рассматриваемой системе двух квадрупольных ядер этот вентиль может быть получен (с точностью до фазового множителя) сочетанием импульсов РЧ поля и интервала свободной эволюции системы под действием гамильтониана H_0 :

$$P_{d_1 d_2}(\theta) = \exp(-iH_J t_J) \cdot \prod_k R_Z^{r_k - s_k}(\varphi_k), \quad H_J = -JI_1^Z I_2^Z, \quad t_J = \theta/J. \quad (7)$$

Во втором разделе описывается несколько вариантов получения вентиля квантового преобразования Фурье (обозначаемого далее как QFT_d) для отдельного кудита. Согласно одному из вариантов, для получения матричного оператора, описывающего действие вентиля:

$$QFT_d = \frac{1}{\sqrt{d}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \dots & \omega^{d-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \dots & \omega^{2(d-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{d-1} & \omega^{2(d-1)} & \dots & \omega^{(d-1)^2} \end{pmatrix}, \quad \omega = \exp\left(\frac{2\pi i}{d}\right), \quad (8)$$

можно воспользоваться общей процедурой разложения произвольной унитарной матрицы [16]. В результате, вентиль QFT_d для кудита с произвольным числом уровней d может быть получен в виде последовательности операторов поворота (5).

Данный способ особенно полезен в тех случаях, когда число d является простым, поэтому он был применен для $d = 3, 5$ и 7 . При этом, полученная для кутритов ($d = 3$) последовательность состоит всего из четырех операторов:

$$QFT_3 = \left\{ \frac{\pi}{2} \right\}_Y^{2-3} \left\{ 2 \operatorname{atg}(\sqrt{2}) \right\}_Y^{1-2} \left\{ \pi \right\}_Z^{1-2} \left\{ -\frac{\pi}{2} \right\}_Y^{2-3}. \quad (9)$$

Для $d = 5$ потребуется уже 17, а для $d = 7$ необходимо 46 операторов.

В остальных случаях, когда число уровней кудита является факторизуемым, может быть применен другой метод разложения, основанный на представлении виртуальных кубитов [13] или кудитов [17]. С помощью данного метода были рассчитаны операторные последовательности для $d = 4, 6, 8, 9$ и 10 .

Полученные последовательности могут быть реализованы, например, с помощью РЧ импульсов для систем из квадрупольных ядер или с помощью лазерных импульсов для атомов или ионов в ловушках. Ранее подобная последовательность была получена только для QFT_3 [18], но последовательность (9) короче. В остальных случаях последовательности операторов были найдены впервые.

В следующих двух разделах показано, как с помощью полученных вентилях QFT_d и $P_{d_1 d_2}(\theta)$ можно реализовать:

1. Другой часто используемый двухкудитовый квантовый вентиль $SUM_{d_1 d_2}$:

$$SUM_{d_1 d_2} = QFT_{d_2} \rightarrow P_{d_1 d_2}(2\pi/d_2) \rightarrow QFT_{d_2}^\dagger, \quad (10)$$

действие которого на состояние $|x\rangle_1$ первого кудита и $|y\rangle_2$ второго кудита определяется выражением:

$$SUM_{d_1 d_2}(|x\rangle_1 \otimes |y\rangle_2) = |x\rangle_1 \otimes |x+y(\bmod d_2)\rangle_2, \quad (11)$$

2. Квантовую схему для вычисления КПФ на системе нескольких кудитов. Рассматривается два случая: система двух произвольных кудитов и система произвольного числа кудитов одной размерности. КПФ играет важную роль в квантовых вычислениях, поскольку доказано, что выполнение КПФ на кубитах дает экспоненциальный прирост производительности по сравнению с

классической реализацией быстрого преобразования Фурье. В случае кудитов, эффективность квантового вычисления будет зависеть от эффективности реализации квантовых вентилях QFT_d и $P_{d_1 d_2}(\theta)$.

Завершает главу описание реализации алгоритма поиска порядка подстановки на системе двух связанных кудитов. Задача определения порядка подстановки [19] является примером сложной вычислительной задачи, для которой существует квантовый алгоритм [15], выполняемый на наборе кубитов и эффективно решающий эту задачу за счет вычислительной мощности КПФ.

В случае двух кудитов, схема реализации алгоритма состоит из вентиля $SUM_{d_1 d_2}$ и двух вентилях QFT_d :

$$QFT_{d_1} \rightarrow SUM_{d_1 d_2} \rightarrow QFT_{d_1}^\dagger, \quad (12)$$

Воспользовавшись полученными ранее разложениями (7) и (10), а также последовательностями операторов поворотов для реализации вентилях QFT_8 и QFT_4 , была получена последовательность РЧ импульсов для реализации алгоритма поиска порядка подстановки на системе связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 7/2$ и $I_2 = 3/2$.

Полученная последовательность была использована для численного моделирования работы квантового алгоритма. Было рассмотрено два случая: с порядком подстановки $r = 2$ и $r = 4$. Исследовалась зависимость результата квантового вычисления от физических параметров системы. Полученные результаты приведены на рис. 1, их анализ показал, что основная ошибка вычисления обусловлена двумя причинами:

1. РЧ импульс, помимо резонансного воздействия на выбранный переход, действует на все остальные переходы [20]. В результате такого неселективного воздействия импульса, ошибка растет с увеличением амплитуды колебаний РЧ поля.

2. Во время действия РЧ импульса на состояние системы также воздействует спин-спиновое взаимодействие. В результате таких искажений ошибка растет с уменьшением амплитуды колебаний РЧ поля.

В результате совместного действия этих эффектов наблюдается минимум на приведенных кривых, значения ошибки в котором растет с увеличением спин-спинового взаимодействия.

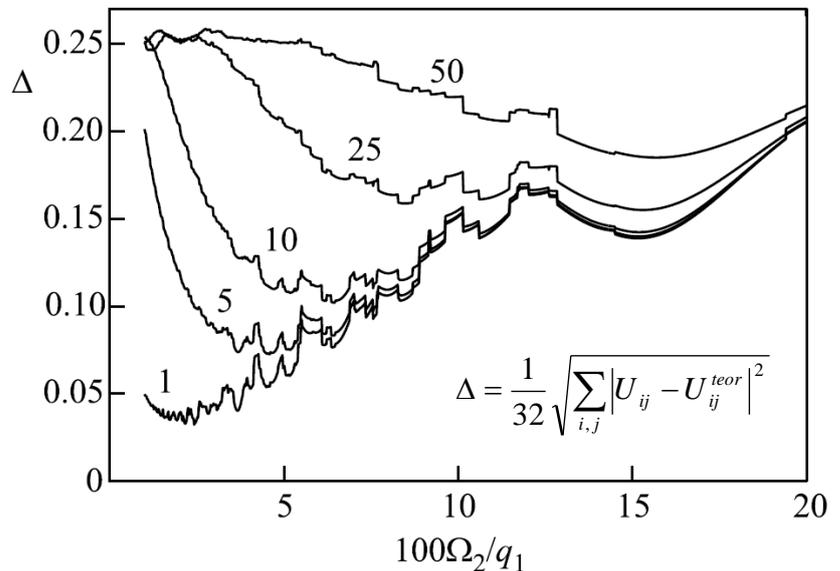


Рис. 1. Зависимость ошибки реализации алгоритма поиска порядка подстановки от амплитуды РЧ поля. Числами на кривых показана величина спин-спинового взаимодействия в единицах $10^5 J/q_1$. Значения других параметров: $\omega_1 = 3000$, $\omega_2 = 6000$, $q_1 = 100$, $q_2 = 200$. Кривые для $r = 2$ и $r = 4$ совпадают.

Во избежание накопления дополнительной ошибки в результате сдвигов фазы, вызванных квадрупольным взаимодействием, длительность РЧ импульсов и интервала свободной эволюции были выбраны кратными величине $2\pi/q_2$ [7] (константы q_1 , q_2 , ω_1 и ω_2 так же были подобраны кратными).

Ранее алгоритм поиска порядка подстановки уже был реализован экспериментально на 5 кубитах [15]. Для сравнения полученной реализации на кубитах с реализацией алгоритма на кубитах, этот эксперимент был воспроизведен численно. Для того, чтобы при моделировании эволюция обеих квантовых систем протекала в идентичных условиях, параметры для описания системы кубитов были взяты отличными от экспериментальных. Результаты моделирования, приведенные на рис. 2, показали близкую точность двух способов выполнения алгоритма. При этом последовательность для кудитов короче и не требует создания сложного многочастичного взаимодействия.

В третьей главе подробно рассматривается один из способов [21] выполнения адиабатических квантовых алгоритмов. За счет того, что на всем протяжении адиабатической эволюции квантовая система находится в основном состоянии, реализация адиабатических квантовых вычислений вызывает значительный интерес среди различных групп экспериментаторов.

Применение рассматриваемого способа позволяет любой алгоритм, представленный в виде последовательности квантовых вентилях:

$$|\psi\rangle = U|0\rangle = U_n U_{n-1} \dots U_1 |0\rangle, \quad (13)$$

выполнить адиабатически. Для этого вводится унитарное преобразование эффективного гамильтониана:

$$K_j = -i \ln U_j, \quad U_j(s_j) = \exp(is_j K_j), \quad s_j = t_j/T_j, \quad 0 \leq t_j \leq T_j, \quad (14)$$

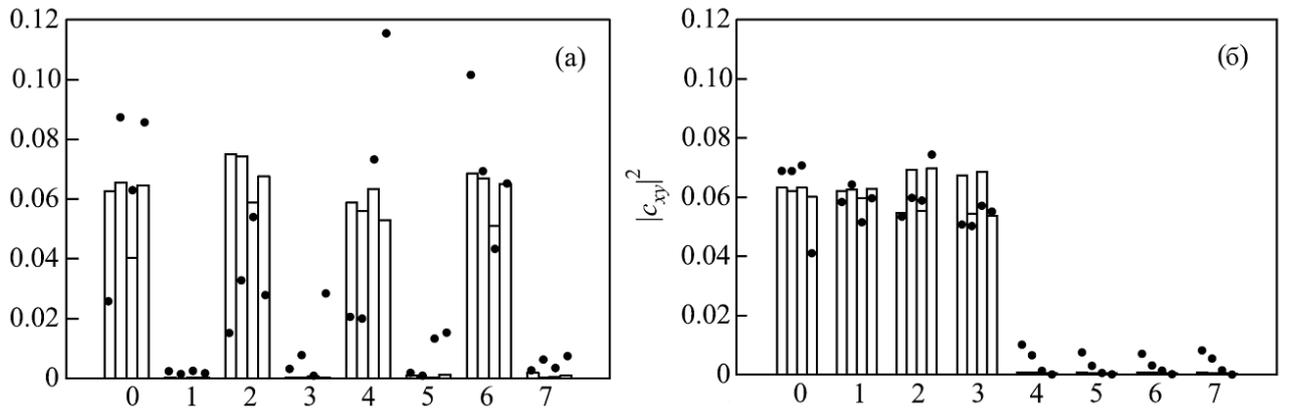


Рис. 2. Вероятности $|c_{xy}|^2$ состояний квантовой системы в конце алгоритма поиска порядка подстановки на двух кудитах (а) и пяти кубитах (б) при $r = 4$. Столбиками показаны значения при $J/q_1 = 10^{-5}$ и $100\Omega_2/q_1 = 2.18$, точками – при $J/q_1 = 10^{-4}$ и $100\Omega_2/q_1 = 6.35$. Значения других параметров для системы кудитов: $\omega_1 = 3000$; $\omega_2 = 6000$; $q_1 = 100$; $q_2 = 200$, для системы кубитов: $\Delta\omega = 10^4$, $\omega_j = j\Delta\omega$, $\Omega_j/\Delta\omega = 0.0125$ $j = 1, 2, \dots, 5$. Числами внизу обозначены номера состояний первого кудита ($x = 0, 1, \dots, 7$), состояния второго кудита ($y = 0, 1, 2, 3$) не указаны и располагаются по порядку слева направо. Для кубитов состояния $|x\rangle$ и $|y\rangle$ представлены совместными состояниями кубитов, сгруппированных в два квантовых регистра.

$$H(s_1, s_2, \dots, s_n) = U_n(s_n) \dots U_2(s_2) U_1(s_1) H(0) U_1^\dagger(s_1) U_2^\dagger(s_2) \dots U_n^\dagger(s_n), \quad (15)$$

где $H(0)$ – начальный гамильтониан, для которого начальное состояние системы $|0\rangle$ является основным.

Гамильтониан (15) допускает несколько способов изменения во времени. Один из них заключается в приравнивании всех параметров s_j между собой ($s_j = s$) и их синхронном увеличении ($T = T_j$). Наряду с этим, в [21] рассматривается ступенчатое последовательное изменение гамильтониана: сначала под действием $U_1(s_1)$, затем – $U_2(s_2)$, и так далее до $U_n(s_n)$. Длительность такой эволюции будет $T = T_1 + \dots + T_n$.

При изучении данного метода выяснилось, что оба способа изменения гамильтониана приводят к очень сложной форме оператора эволюции и при экспериментальной реализации потребуют применения большого числа операций для выполнения такой эволюции.

Однако было обнаружено, что если при ступенчатом последовательном изменении гамильтониана изменить порядок «включения» вентилях на обратный: от $U_n(s_n)$ к $U_1(s_1)$, то появляется возможность существенно упростить вид оператора эволюции, который в конечном итоге можно записать как:

$$U_T = U \exp\left\{-iT_1\left(H(0) + \frac{K_1}{T_1}\right)\right\} \exp\left\{-iT_2\left(H(0) + \frac{K_2}{T_2}\right)\right\} \dots \exp\left\{-iT_n\left(H(0) + \frac{K_n}{T_n}\right)\right\}. \quad (16)$$

То есть, адиабатическая эволюция задается чередованием «включаемых» вентилях с интервалами эволюции под действием начального гамильтониана $H(0)$.

При этом, условие адиабатичности требует, чтобы разница между энергетическими уровнями $H(0)$ превосходила величину соответствующих матричных элементов операторов K_j/T_j :

$$\frac{1}{T_j} |\langle m | K_j | n \rangle| \ll |E_n - E_m|. \quad (17)$$

В адиабатическом пределе $T \rightarrow \infty$, любой из способов изменения гамильтониана (15) должен приводить к точному результату, совпадающему с (13), но при конечном T неизбежна ошибка, величина которой может зависеть от способа включения.

Поэтому, на примере двух алгоритмов: поиска порядка подстановки для системы пяти кубитов и КПФ для трех кубитов, было выполнено численное моделирование адиабатического квантового вычисления при трех способах изменения эффективного гамильтониана. Результаты показаны на рис. 3.

Зависимость ошибки от протяженности эволюции показывает, что предлагаемый в работе способ обратного последовательного действия операторов в (15) не уступает по точности способу, предложенному в [21].

Кроме того, экспериментальная реализация подразумевает переход от непрерывного изменения гамильтониана к дискретному с малыми конечными интервалами Δt , в течение которых форма гамильтониана не меняется:

$$s = t/T, \quad 0 \leq t \leq T \rightarrow s = m/M, \quad m = 0, 1, \dots, M, \quad M = T/\Delta t. \quad (18)$$

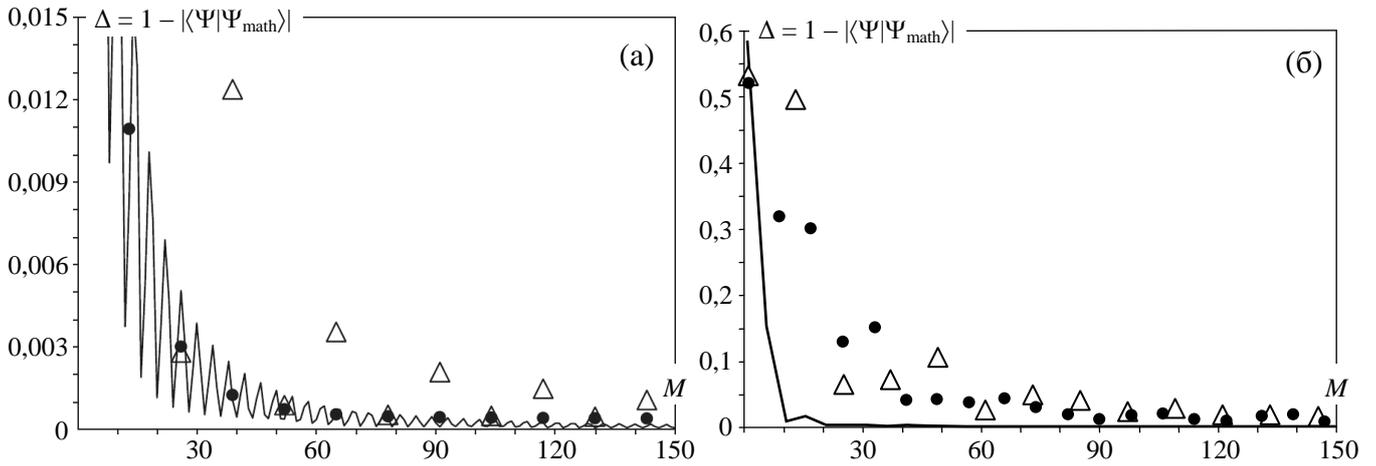


Рис. 3. Ошибка реализации квантового адиабатического алгоритма: а) поиска порядка подстановки на пяти кубитах, б) квантового преобразования Фурье на трех кубитах, в зависимости от протяженности эволюции $M = T/\Delta t$. Сплошная линия – изменение гамильтониана с одновременным действием всех квантовых вентилях, треугольники – с последовательным действием от первого вентиля к последнему, точки – с обратным действием от последнего вентиля к первому.

Как было отмечено выше, общее время адиабатической эволюции зависит от способа изменения гамильтониана. В нашем случае это приводит к тому, что при одинаковом значении M , изменение гамильтониана с одновременным действием операторов показывает меньшую ошибку, т.к. выполняется с Δt , отличным от двух других случаев.

В четвертой главе рассматриваются способы реализации адиабатического вычисления на кубитах. В первой части главы рассматривается адиабатическое выполнение алгоритма поиска порядка подстановки (12) на системе двух квадрупольных ядер, управляемых методами ЯМР. Последовательность РЧ импульсов, полученная во второй главе, была преобразована с помощью унитарного преобразования (14). При этом удалось получить эффективный гамильтониан $H(s)$, зависящий лишь от одного параметра s .

Полученные последовательности были использованы для численного моделирования работы адиабатического квантового алгоритма. Было рассмотрено два случая: с порядком подстановки $r = 2$ и $r = 4$. Исследовалась зависимость результата квантового вычисления от физических параметров системы и от протяженности эволюции. Полученные результаты приведены на рис. 4 и рис. 5.

Как и ранее, на точность адиабатического вычисления влияет воздействие РЧ импульсов на нерезонансные переходы, а также их искажение за счет спин-спинового взаимодействия. Кроме того, на рис. 4 наблюдаются сильные осцилляции в результате фазовых искажений. Результат, представленный на рис. 5, показывает, что при соблюдении условия (17), квантовое адиабатическое вычисление дает верный результат.

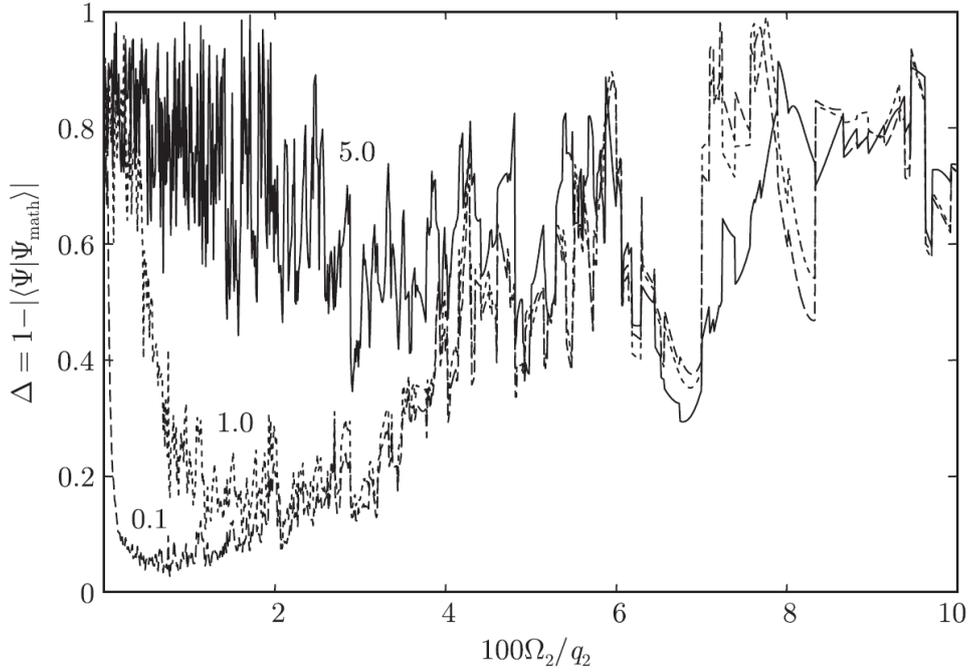


Рис. 4. Ошибка реализации квантового адиабатического алгоритма поиска порядка подстановки на двух кубитах в зависимости от амплитуды РЧ поля. Числами на кривых указана величина спин-спинового взаимодействия в единицах $10^5 J/q_2$. Значения других параметров: $\omega_1 = 5000$, $\omega_2 = 3000$, $q_1 = 200$, $q_2 = 100$, $r = 4$, $M = 50$.

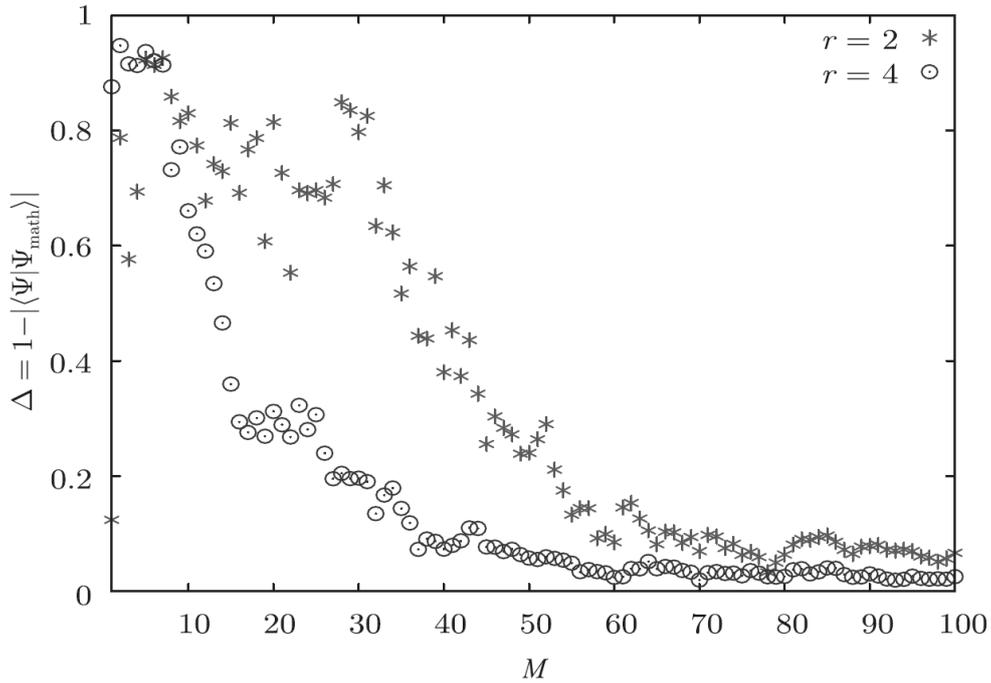


Рис. 5. Ошибка реализации квантового адиабатического алгоритма поиска порядка подстановки на двух кубитах в зависимости от протяженности эволюции $M = T/\Delta t$. Значения других параметров: $\omega_1 = 5000$, $\omega_2 = 3000$, $q_1 = 200$, $q_2 = 100$, $\Omega_2 / q_2 = 5 \cdot 10^{-3}$, $J / q_2 = 10^{-6}$.

Во второй части главы на примере задачи факторизации (разложения числа на множители) рассматривается другой способ организации адиабатических квантовых вычислений, при котором форма конечного гамильтониана

определяется некоторой весовой функцией таким образом, что состояние квантовой системы в конце вычисления содержит ответ на поставленную задачу [22].

Как и в предыдущих случаях, работа алгоритма рассматривается на системе связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = (d_1-1)/2$ и $I_2 = (d_2-1)/2$, управляемых методами ЯМР. Максимальное допустимое значение факторизуемого числа определяется соотношением:

$$N = (2d_1-1)(2d_2-1). \quad (19)$$

Адиабатический алгоритм осуществляется под действием зависящего от времени гамильтониана:

$$H(s) = (1-s)H_c + sH_p, \quad s = t/T, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (20)$$

В качестве начального состояния берется состояние суперпозиции. Так как оно должно быть основным состоянием гамильтониана H_c , начальный гамильтониан имеет вид:

$$H_c = (QFT_{d_1} \otimes QFT_{d_2}) \cdot H_0 \cdot (QFT_{d_1} \otimes QFT_{d_2})^\dagger. \quad (21)$$

Решение задачи факторизации определяется весовой функцией $W = (N-pq)^2$, которой соответствует гамильтониан:

$$H_p = Q(N - (d_1 - 2I_1^z)(d_2 - 2I_2^z))^2, \quad (22)$$

где Q – масштабный множитель, необходимый для обеспечения соизмеримости с (21). Если выполняется равенство $N = pq$, то основное состояние гамильтониана (22) с равной нулю энергией достигается, когда проекции спинов

$$I_1^z = \frac{d_1 - p}{2} \text{ и } I_2^z = \frac{d_2 - q}{2}, \quad (23)$$

т.е. для получения решения задачи необходимо измерить проекции спинов в конце выполнения алгоритма.

В результате вычислений было получено разложение для гамильтонианов (21) и (22) и составлена последовательность из РЧ импульсов, чередующихся с интервалами свободной эволюции, позволяющая реализовать квантовый адиабатический алгоритм факторизации. Эта последовательность была использована для численного моделирования работы алгоритма в случае квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 3/2$ и $I_2 = 1$. Была выполнена факторизация трех чисел: 35, 21 и 15. Исследовалась зависимость результата квантового вычисления от физических параметров системы и от протяженности эволюции. Полученные результаты приведены на рис. 6 и рис. 7.

Аналогично предыдущему случаю, наблюдалось сильное влияние фазовых искажений. Для устранения этой ошибки была применена подстройка амплитуд РЧ импульсов и их длительности. Оставшаяся ошибка, как и ранее, обусловлена неселективным воздействием РЧ импульсов на нерезонансные переходы и их искажением под действием спин-спинового взаимодействия.

Из рис. 7 видно, что с увеличением времени эволюции повышается точность вычисления, что свидетельствует о выполнении условия адиабатичности. Также видно, что при факторизации числа $N = 21$ требуется большее время эволюции для достижения той же точности. Это объясняется тем, что форма конечного гамильтониана (22) зависит от значения факторизуемого

числа, и в случае $N = 21$ разница энергий $\Delta\varepsilon$ между основным состоянием и первым возбужденным меньше, чем в остальных случаях.

$$\Delta\varepsilon_{21} = 16Q, \quad \Delta\varepsilon_{15} = 36Q, \quad \Delta\varepsilon_{35} = 100Q \quad (24)$$

В заключении сформулированы основные результаты работы и выводы.

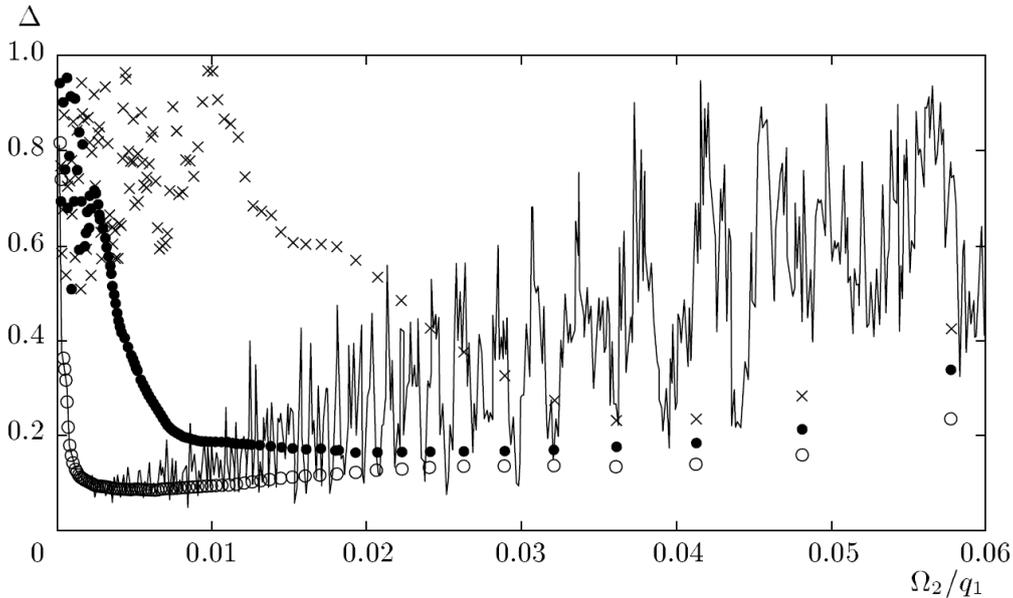


Рис. 6. Ошибка $\Delta = 1 - |\langle \Psi | \Psi_{\text{math}} \rangle|$ реализации адиабатического алгоритма факторизации для числа $N = 35$, в зависимости от амплитуды РЧ поля Ω_2 / q_1 и величины спин-спинового взаимодействия: $J / q_1 = 10^{-6}$ (сплошная линия и круги), $J / q_1 = 10^{-5}$ (точки), $J / q_1 = 5 \cdot 10^{-5}$ (кресты). Значения других параметров: $\omega_1 = 30q_1$, $\omega_2 = 50q_1$, $q_2 = 2q_1$, $q_1\Delta t = \pi/100$, $M = 20$.

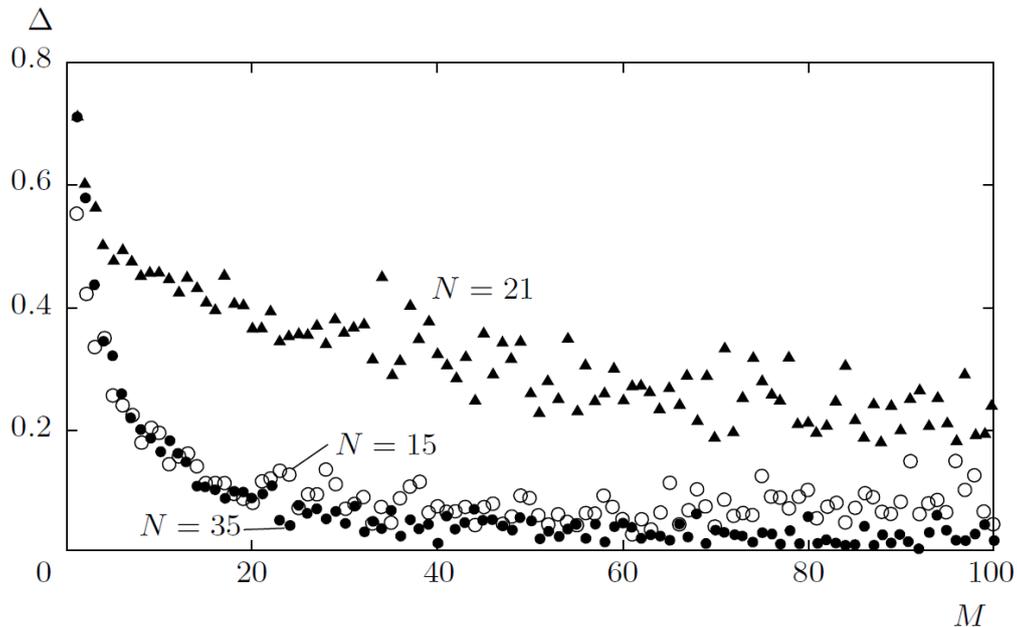


Рис. 7. Ошибка $\Delta = 1 - |\langle \Psi | \Psi_{\text{math}} \rangle|$ реализации адиабатического алгоритма факторизации для трех чисел в зависимости от времени эволюции $M = T/\Delta t$. Значения других параметров: $\omega_1 = 30q_1$, $\omega_2 = 50q_1$, $q_2 = 2q_1$, $q_1\Delta t = \pi/100$, $J / q_1 = 10^{-6}$.

Основные результаты работы

1. Разработаны схемы для практического осуществления квантового преобразования Фурье на кудитах с числом уровней от 3 до 10. Рассчитаны последовательности РЧ импульсов, селективных по переходам между уровнями, для реализации вентилей КПФ на отдельных кудитах, представленных квадрупольными ядрами со спином $1 \leq I \leq 9/2$. Последовательности для случаев ядер со спинами $3/2 \leq I \leq 9/2$ найдены впервые.
2. Предложен оригинальный способ адиабатической реализации квантовых алгоритмов, представленных в виде стандартной вычислительной схемы из последовательности квантовых вентилей. Адиабатическое включение вентилей осуществляется за счет унитарного преобразования эффективного гамильтониана, под действием которого выполняется исходный алгоритм. На примере двух алгоритмов: КПФ для трех кубитов и поиска порядка подстановки для пяти кубитов, показано, что существует способ включения последовательности вентилей, который допускает более простую, по сравнению с другими способами, последовательность РЧ импульсов.
3. Впервые получена схема для выполнения квантового алгоритма поиска порядка подстановки на двух кудитах и рассчитана последовательность РЧ импульсов для реализации алгоритма на системе связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 7/2$ и $I_2 = 3/2$, выполнено численное моделирование работы алгоритма. Проведено сравнение со случаем реализации алгоритма на пяти кубитах, которое показало близкую точность двух способов при сопоставимых значениях параметров. Также найдена последовательность РЧ импульсов для включения эффективного гамильтониана при адиабатической реализации данного алгоритма, выполнено численное моделирование работы адиабатического алгоритма, рассчитана зависимость ошибки от параметров.
4. Для системы двух кудитов впервые получена схема для выполнения адиабатического квантового алгоритма факторизации посредством нахождения основного состояния системы, минимизирующего некоторую весовую функцию. Рассчитана последовательность РЧ импульсов для получения изменяющегося во времени эффективного гамильтониана и выполнено численное моделирование факторизации чисел 35, 21 и 15 на системе связанных квадрупольных ядер со спинами $I_1 = 3/2$ и $I_2 = 1$. Показано, что при реализации алгоритма основной вклад в ошибку вносят фазовые искажения, которые можно уменьшить подбором длительностей и амплитуд РЧ импульсов. Оставшаяся ошибка обусловлена двумя причинами: неселективностью РЧ импульсов и их искажением в результате спин-спинового взаимодействия.

Публикации автора по теме диссертации

1. Зобов В. Е., Ермилов А. С. Последовательности импульсов для реализации квантового преобразования Фурье на многоуровневых системах // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 83. – В. 10. – С. 539.
2. Зобов В. Е., Ермилов А. С. О реализации стандартных квантовых вычислительных сетей посредством адиабатической эволюции // ТМФ. – 2007. – Т. 150. – № 3. – С. 462.
3. Ермилов А. С., Зобов В. Е. Представление квантового преобразования Фурье на многоуровневых базовых элементах с помощью последовательности операторов селективных поворотов // Оптика и спектроскопия. – 2007. – Т. 103. – № 6. – С. 994.
4. Зобов В. Е., Шауро В. П., Ермилов А. С. Выполнение квантового алгоритма поиска порядка подстановки на двух кудитах // Письма в ЖЭТФ. – 2008. – Т. 87. – В. 6. – С. 385.
5. Зобов В. Е., Ермилов А. С. О выполнении квантового адиабатического алгоритма факторизации на двух кудитах // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 141. – В. 6. – С. 1060.
6. Ермилов А. С., Зобов В. Е. Реализация квантового преобразования Фурье посредством адиабатической эволюции: моделирование для случая трех ядерных спинов // Вестник КрасГУ. – 2006. – № 9. – С. 26.
7. Ermilov A. S., Zobov V. E. Implementation of the quantum order-finding algorithm by adiabatic evolution of two qudits // Quantum Computers and Computing. – 2009. – V. 9. – P. 39.
8. Ермилов А. С. Моделирование адиабатических квантовых алгоритмов // НКСФ – 2004: Тезисы докладов научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков. – 2004. – С. 21.
9. Ермилов А. С. Дискретное квантовое преобразование Фурье посредством управляемой адиабатической эволюции // НКСФ – 2005: Тезисы докладов научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков. – 2005. – С. 65.
10. Ермилов А. С., Зобов В. Е. Моделирование стандартных квантовых вычислительных сетей посредством адиабатической эволюции, управляемой методами ЯМР // Моделирование неравновесных систем (МНС – 2005): Материалы VIII всероссийского семинара. – 2005. – С. 63.
11. Ермилов А. С. Физическая реализация квантового преобразования Фурье на многоуровневых системах // ВНКСФ – 12: Материалы конференции, тезисы докладов / Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2006. – С. 714.
12. Ermilov A. S., Zobov V. E. Implementation of the quantum order-finding algorithm by adiabatic evolution of two qudits // International conference “Micro- and nanoelectronics – 2009”: Book of abstracts. – 2009. – P. Q3-11.

Список цитируемой литературы

1. Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. / К. А. Валиев, А. А. Кокин. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 352 с.
2. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация: пер. с англ. / М. Нильсен, И. Чанг. – М.: Мир, 2006. – 824 с.
3. Gottesman D. Fault-Tolerant Quantum Computation with Higher-Dimensional Systems // Lect. Notes. Comput. Sci. – 1999. – V. 1509. – P. 302.
4. Daboul J., Wang X., Sanders B. C. Quantum gates on hybrid qudits // J. Phys. A.: Math. Gen. – 2003. – V. 36. – P. 2525.
5. Vlasov A. Yu. Noncommutative tori and universal sets of nonbinary quantum gates // J. Math. Phys. – 2002. – V. 43. – P. 2959.
6. Jones J. A. Quantum Computing with NMR // Prog. NMR Specrosc. – 2011. – V. 59. – P. 91.
7. Das R., Kumar A. Use of quadrupolar nuclei for quantum-information processing by nuclear magnetic resonance: Implementation of a quantum algorithm // Phys. Rev. A. – 2003. – V. 68. – P. 032304.
8. Kampermann H., Veeman W. S. Characterization of quantum algorithms by quantum process tomography using quadrupolar spins in solid-state nuclear magnetic resonance // J. Chem. Phys. – 2005. – V. 122. – P. 214108.
9. Gopinath T., Kumar A. Implementation of controlled phase shift gates and Collins version of Deutsch-Jozsa algorithm on quadrupolar spin-7/2 nucleus using non-adiabatic geometric phases // J. Magn. Reson. – 2008. – V. 193. – P. 168.
10. Soares-Pinto D. O., Celeri L. C., Auccaise R. et al. Nonclassical correlation in NMR quadrupolar system // Phys. Rev. A. – 2010. – V. 81. – P. 062118.
11. Motzoi F., Gambetta J. M., Rebentrost P. et al. Pulses for Elimination of Leakage in Weakly Nonlinear Qubits // Phys. Rev. Lett. . – 2009. – V. 103. – P. 110501.
12. Ralph T. C., Resch K. J., Gilchrist A. Efficient Toffoli Gates Using Qudits // Phys. Rev. A. – 2007. – V. 75. – P. 022313.
13. Кессель А. Р., Ермаков В. Л. Многокубитный спин // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 70. – С. 59.
14. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. / Ч. Сликтер. – М.: Мир, 1981. – 448 с.
15. Vandersypen L. M. K., Steffen M., Breyta G. et al. Experimental Realization of Order-Finding Algorithm with NMR Quantum Computer // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85. – P. 5452.

16. Brennen G. K., O’Leary D. P., Bullock S. S. Criteria for exact qudit universality // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V. 71. – P. 052318.
17. Muthukrishnan A., Stroud (Jr.) C. R. Quantum fast Fourier transform using multilevel atoms // *J. Mod. Optics.* – 2002. – V. 49. – P. 2115.
18. Klimov A. B., Guzman R., Retama J. C., Saavedra C. Qutrit quantum computer with trapped ions // *Phys. Rev. A.* – 2003. – V. 67. – P. 062313.
19. Сачков В. Н. Введение в комбинаторные методы дискретной математики. / В. Н. Сачков. – М.: Наука, 1982. – 384 с.
20. Berman G. P., Doolen G. D., Lopez G. V., Tsifrinovich V. I. Nonresonant effects in the implementation of the quantum Shor algorithm // *Phys. Rev. A.* – 2000. – V. 61. – P. 042307.
21. Siu M. S. From quantum circuits to adiabatic algorithms // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V. 71. – P. 062314.
22. Peng X., Liao Z., Xu N. et al. Quantum adiabatic algorithm for factorization and its experimental implementation // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 101. – P. 220405.

Ермилов Андрей Сергеевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА
НА КВАДРУПОЛЬНЫХ ЯДРАХ

автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 15.11.2013. Заказ № 69
Формат 60x90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 70 экз.
Типография ФГБУН Института физики им. Л. В. Киренского СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, 50

